京都大学学術情報リポジトリ
KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

京都大学 KYOTO UNIVERSITY

Title	非平衡統計力学における変分原理-中野氏の提案を具体化する方法について-(非線型・非平衡状態の統計力学,研究会報告)
Author(s)	長谷川, 洋
Citation	物性研究 (1976), 26(1): A25-A32
Issue Date	1976-04-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/89135
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

Kyoto University

別記２） $D_{ij}(a)$ が常数でない場合には，Wong−Zakai の conjecture (5) 又は同等な式(13) の制約を受けて不十分である。(13) 式は多次元の場合には

$$\xi_i(a) = \frac{1}{2} \Sigma D_{ij}(a) \frac{\partial}{\partial a_j} \log \sqrt{\det D_{ij}(a)}$$

と変更しなければいけない様である。

非平衡統計力学における変分原理

― 中野氏の提案を具体化する方法について ―

京大・理　長谷川　　洋

§序　中野氏の提案というのは，２年ほど前に Progress letter に発展された

Generalization of Onsagers Thermostatical Theory of Irreversible Processes and the Transition between Dissipative Structures

という小論文[1)]で述べておられることで，Onsager の 1931年の論文に示唆されている変分原理を非線型非可逆過程に拡張しようというものである。これは容易ならないことであるが，筆者も，この問題には永い間興味があったので，その後この２年間力を注ぐこととなった。近頃ようやく一つの案が出来たので，この機会に発表させていただく。（ここでは概略にとどめ，より詳しいことをなるべく早い機会に本誌に投稿する積りでいる。）

§ 1.　Onsager−Machlup 公式

Chapman−Kolmogoroff 関係式

$$\int P(x^{(2)}t_2 | xt)\, P(xt | x^{(1)}t_1)\, dx = P(x^{(2)}t_2 | x^{(1)}t_1)$$

に従う古典的マルコフ過程を考える。２時間結合確率

$$W(x^{(1)}t_1, x^{(2)}t_2) = P(x^{(2)}t_2 | x^{(1)}t_1)\rho_0(x^{(1)}t_1),$$

更に n 時間結合確率

$$W(x^{(1)}t_1, x^{(2)}t_2, \cdots x^{(n)}t_n)$$
$$= P(x^{(n)}t_n | x^{(n-1)}t_{n-1})P(x^{(n-1)}t_{n-1} | x^{(n-2)}t_{n-2}) \cdots$$
$$\cdots P(x^{(2)}t_2 | x^{(1)}t_1)\rho_0(x^{(1)}t_1),$$

を，いわゆる散逸関数の時間積分を用いて与える式を Onsager−Machlup の 2−gate (n−gate) 公式と呼ぶ。

$$\log W(x^{(1)}t_1, x^{(2)}t_2) = \frac{1}{2}(\log\rho_0(x^{(1)}t_1) + \log\rho_0(x^{(2)}t_2)) - \int_{t}^{t_2}\frac{1}{2}〔散逸関数〕dt + \text{const} \tag{1}$$

$$(x = x^{(i)} \quad t = t_i \quad i = 1, 2)$$

n−gate 公式は，2−gate 公式の組合せとして同様な表式に書かれるので，問題は，2−gate 公式 (1) に reduce される。Onsager−Machlup はガウス・マルコフ（線型ブラウン運動）の場合，〔散逸関数〕の具体形を与えた。[2)] 一般のマルコフ過程に対して，これがどのように表わされるかが問題となるが，ここでは次の場合一つの答を出そうとするものである。

I.　一般拡散過程

前方方程式　$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_\mu}(v_\mu\psi) + \frac{\partial}{\partial x_\mu}(D_{\mu\nu}\frac{\partial\psi}{\partial x_\nu}) \tag{I(a)}$$

後退方程式　$$-\frac{\partial f}{\partial t} = v_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu}f + \frac{\partial}{\partial x_\mu}(D_{\mu\nu}\frac{\partial f}{\partial x_\nu}) \tag{I(b)}$$

Ⅱ. マスター方程式に従う連続過程

前方方程式 $$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \int \left(W(x \leftarrow x')\psi(x') - W(x' \leftarrow x)\psi(x) \right) dx' \qquad \text{Ⅱ(a)}$$

後退方程式 $$-\frac{\partial f}{\partial t} = \int \left(f(x') - f(x) \right) W(x' \leftarrow x)\, dx' \qquad \text{Ⅱ(b)}$$

〔散逸関数〕は，ここの方法では事象 x のある関数の積分として表わされ， いわゆる "most probable path" の汎函数という形式に表現するためには，近似手続きが必要となる。そのために n−gate 公式を用いることとなる（§4）。§2 では x および tの2種類の関数 ρ, S の汎関数 $\Phi\{\rho, S\}$ として具体形を示す。$\rho(xt)$, $S(xt)$ は，それぞれの場合の前方方程式の解 $\psi(xt)$ のみならず，対応する後退方程式の解 $f(xt)$ をも用いて，次のように与えられる。

$$\rho(xt) = f(xt)\psi(xt) \tag{2}$$

$$S(xt) = \frac{1}{2}\log\frac{f(xt)\rho_0(xt)}{\psi(xt)} \tag{3}$$

ここに $\rho_0(xt)$ は公式 (1) に現れる補助的確率分布で，多くの場合前方方程式の定常分布が有効であるが，一般的には，前方方程式の time−dependent な解であればよい。

$\psi(xt)$ および $f(xt)$ の具体形は，発展方程式 (a)，(b) の初期値問題から求められる。 2−gate の場合，(t_1, t_2) に対し，次の条件を課す。

$$\psi(xt) = \text{const}\ \ \delta(x - x^{(1)}) \qquad t = t_1 \tag{4a}$$

$$f(xt) = \text{const}\ \ \delta(x - x^{(2)}) \qquad t = t_2 \tag{4b}$$

定数因子は（それぞれ独立には定まらないが，その積が）規格化条件

$$\int \rho(xt)\, dx = 1 \tag{5}$$

に従うものとして求められ，従って $\rho(xt)$ の具体形として

$$\rho(xt)=\frac{P(x^{(2)}t_2|xt)P(xt|x^{(1)}t_1)}{P(x^{(2)}t_2|x^{(1)}t_1)}\qquad t_1\le t\le t_2 \tag{6}$$

が得られる。すなわち $\rho(xt)$ 自体が2時間結合確率に比例する確率分布を意味する量である。(これに対し $S(xt)$ は“作用”に相当する共軛変分関数である。)

〔散逸関数〕の表式[注1]

Ⅰ. $$\Phi\{\rho,S\}=\frac{1}{2}\int(D^{-1}_{\mu\nu}V_\mu(S)V_\nu(S)+D_{\mu\nu}X_\mu(\rho)X_\nu(\rho))\,\rho\,dx \tag{7}$$

$$\left(V_\mu(S)\equiv 2D_{\mu\nu}\frac{\partial S}{\partial x_\nu},\quad X_\mu(\rho)\equiv-\frac{\partial}{\partial x_\mu}\log\frac{\rho}{\rho_0}\qquad \text{(7a)}\right)$$

Ⅱ. $$\Phi\{\rho,S\}=\iint 2(S(x)-S(x')-1)\,e^{S(x)-S(x')}(\rho(x)\rho(x'))^{1/2}\left(\frac{\rho_0(x')}{\rho_0(x)}\right)^{1/2}W(xx')dx'dx$$
$$+\iint\left(\frac{\rho(x)}{\rho_0(x)}+\frac{\rho(x')}{\rho_0(x')}\right)W(xx')\,\rho_0(x')\,dx'\,dx \tag{8}$$

注1. 公式(7)はOnsager—Machlupのガウス・マルコフ過程の式に対比し得るもので，$V_\mu(S)$ が flux 成分 $\dot{x}_\mu$，$X_\mu(\rho)$ が force 成分 X_μ に相当している。公式(8)は見易くないが，これをKramers—Moyal 展開することにより扱い易くすることが出来る(§6)。以下§2で先づこの結果の導き方を説明する。

§2. H—定理と変分原理の関係

公式(1)は，一言で云えば，それぞれの場合の発展方程式(a)，(b)の解に対し成立するH—定理の帰結である。又，その逆として，発展方程式(a)，(b)は，$\Phi\{\rho,S\}$ を含む．以下のような変分原理の帰結である。

$$\int_{t_1}^{t_2}\mathscr{L}\{\rho,S\}\,dt_{\ \delta\rho,\delta S}=\text{stationary} \tag{9}$$

$$\mathscr{L}\{\rho,S\}=\int S\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}+C(\rho,S)\right)dx+\frac{1}{2}\Phi\{\rho,S\} \tag{10}$$

すなわち，(9) における停留条件を満足する ρ, S は

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -C(\rho, S), \quad \frac{\partial S}{\partial t} = K(\rho, S) \tag{11}$$

のように一定の発展方程式に従うことが導かれ，それは ψ および f の方程式 (a), (b) と同等であることがわかる。そのとき，H− 定理は一つの変分等式に相当し，次のように表わされる。

$$\frac{d}{dt}\int S\rho\, dx = \mathscr{L}\{\rho, S\}_{\mathrm{optim.}} = \frac{1}{2}\Phi\{\rho, S\}_{\mathrm{optim.}} \tag{12}$$

公式 (1) は，変分等式 (12) の両辺を t について (t_1, t_2) 間で積分し，ψ, t について初期条件 (4a, b) を課することにより得られるものである。(詳細は，文献[3])

変分等式 (12) を導く H− 定理

後退方程式に関するもの

I. $$\frac{d}{dt}\int(\log f) f \psi\, dx = \int D_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\log f\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu}\log f\right) f \psi\, dx \tag{13}$$

II. $$\frac{d}{dt}\int(\log f) f \psi dx = \iint \left(\log\frac{f(x)}{f(x')} - 1 + \frac{f(x')}{f(x)}\right) f(x) W(xx') \psi(x')\, dx'\, dx \tag{14}$$

前方方程式に関するもの[注2]

I. $$-\frac{d}{dt}\int\left(\log\frac{\psi}{\rho_0}\right) f \psi dx = \int D_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\log\frac{\psi}{\rho_0}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu}\log\frac{\psi}{\rho_0}\right) f \psi\, dx \tag{13'}$$

II. $$-\frac{d}{dt}\int\left(\log\frac{\psi}{\rho_0}\right) f \psi\, dx = \iint\left(\log\frac{\psi(x)\,\rho_0(x')}{\rho_0(x)\,\psi(x')} - 1 + \frac{\psi(x')\,\rho_0(x)}{\rho_0(x')\,\psi(x)}\right) \times f(x') W(x'x) \psi(x)\, dx'\, dx \tag{14'}$$

$$(12)\ :\quad \mathrm{I}.\ \frac{1}{2}\left((13)+(13') \right)$$

$$\mathrm{II}.\ \frac{1}{2}\left((14)+(14') \right)$$

注 2.　通常の H– 定理は前方方程式の等式において f ＝ 1 と置いた場合に相当する。

§ 3.　「時間反転」に関する考察[4),5)]　　（省略）

§ 4.　非可逆過程変分原理への移行

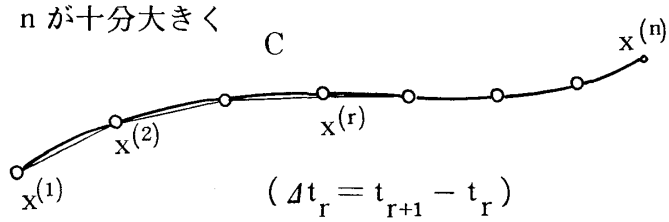
既述の変分原理とその結果を示す (9) ～ (12) およびその単なる積分に過ぎない 2 − gate 公式は，通常の力学と同質のものであって，まだ非可逆過程になっていないと云える。（変分の条件は停留条件であって非可逆過程に特有な極小（大）値条件になっていない。）後者がどのようにして現れるかについて，考え方を述べる。（厳密ではない）先ず，n − gate 公式を作る。

$$\log W(x^{(1)}t_1, \cdots, x^{(n)}t_n) = \log \rho_0(x^{(1)})$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{r=1}^{n}\left(\int_{t_r-1}^{t_r}\Phi\{\rho,S\}\,dt_{\mathrm{optim}} - \left(\log\rho_0(x^{(r)}) - \log\rho_0(x^{(r-1)})\right)\right) + \mathrm{const.}$$

$$\rho(x\,t) = \frac{P(x^{(r)}t_r\,|\,x\,t)\,P(x\,t\,|\,x^{(r-1)}t_{r-1})}{P(x^{(r)}t_r\,|\,x^{(r-1)}t_{r-1})} \qquad t_{r-1} \leq t \leq t_r$$

$x^{(1)}, x^{(2)}, \cdots x^{(n)}$ を $(x^{(1)}, x^{(n)})$ をつなぐ一つの滑らかな曲線C 上に適当な間隔でえらび折線でつなぐ。区間 $(t_{r-1}\ t_r)$ での Φ は，それをきめる分布 $P(x\,t)$ が弧 $(x^{(r-1)}x^{(r)})$ 上でのみ値を取る δ − 関数で近似する。n が十分大きく分点が密になっているとすれば



$(\Delta t_r = t_{r+1} - t_r)$

$$\log\rho_0(x^{(r)}) - \log\rho_0(x^{(r-1)}) \fallingdotseq \frac{\partial \log\rho_0(x^{(r)})}{\partial x_\mu}\,\frac{x_\mu^{(r)} - x_\mu^{(r-1)}}{\Delta t_r}\,\Delta t_r$$

$$\fallingdotseq X_\mu(x^{(r)})\ \dot{x}_\mu^{(r)}\,\Delta t_r$$

又，$\Phi\{\rho, S\} = \Phi(x(t), \dot{x}(t))$ は path C 上の位置 x と速度 $\dot{x}$ の汎関数となる。(その形はそれぞれの過程によって異る。)

$$\log W(x^{(1)}t_1, \cdots, x^{(n)}t_n) \fallingdotseq \log \rho_0(x^{(1)}) - \frac{1}{2}\int_{t_1}^{t_n} (\Phi(x(t), \dot{x}(t)) - X_\mu \dot{x}_\mu)\, dt_{\text{min.}} + \text{const.} \tag{19}$$

ここでの変分は，$(x^{(1)}, \cdots, x^{(n)})$ を通る可能な(滑らか) path $x(t)$ すべてとともに $\dot{x}(t)$ を変化させる。その時，いわゆる most probable path C_0 が定まり，又(19)の変分が極小条件に従うことが期待される(散逸極小)。

§5. 「散逸極小」の表現　　　(省略)

§6. 具体的な結果

Ⅰ. 一般拡散過程

附加条件 (21) ：
$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\mu}(v_\mu - v_\mu^0 + 2D_{\mu\nu}\frac{\partial S}{\partial x_\nu})\rho$$

$$(v_\mu^0 \equiv D_{\mu\nu}\frac{\partial}{\partial x_\nu}\log\rho_0 = D_{\mu\nu}X_\nu)$$

<u>lemma.</u> ρ が曲線 C 上の δ−分布，$\rho(x) = \delta(x - x(t))$ ならば，連続方程式 $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}(V\rho) = 0$ の V は $x(t)$ に沿って速度 $\dot{x}(t)$ に一致する。

$\dot{x}_\mu = v_\mu(x(t)) - v_\mu^0(x(t)) + 2D_{\mu\nu}\frac{\partial S}{\partial x_\nu}$． これより $\Phi(x\dot{x})$ が求められる。((7) 式において，$V_\mu(S) = \dot{x}_\mu - (v_\mu - v_\mu^0)$ とすればよい。)

Ⅱ. マスター方程式

(21) ：
$$\frac{\partial\rho(x)}{\partial t} + \int (W(x'\leftarrow x) f(x')\psi(x) - W(x\leftarrow x') f(x)\psi(x'))\, dx' = 0$$

Kramers−Moyal 展開[6] より近似的に

$$\dot{x}(J, x) = \int \bar{\omega}(r; x) e^{rJ}\, r\, dr = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{C}_{n+1}(x)}{n!} J^n$$

ただし　$J = \dfrac{\partial S}{\partial x}$　　($\bar{C}_1 = 0$ と考えられる。)

同様に Φ も J に関しベキ展開され，J をパラメタとする Φ の展示が得られる。

散逸関数	Onsager relation
I. $\Phi(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} D^{-1}_{\mu\nu} (\dot{x}_\mu - (v_\mu - v^0_\mu))(\dot{x}_\nu - (v_\nu - v^0_\nu)) + \frac{1}{2} D_{\mu\nu} X_\mu X_\nu$	$\dot{x}_\mu = v_\mu(x(X))$ $x(X)$: $X_\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} \log \rho_0(x)$ ポテンシャル条件あるとき $L_{\mu\nu}(X) = M_{\mu\nu}(X) + D_{\mu\nu}(x(X))$
II. $\Phi(x, \dot{x}) = 2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n \bar{C}_n}{(n-2)!\,n} J^n + [J-\text{independent}]$ $\dot{x} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\bar{C}_{n+1}}{n!} J^n$	$X = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial J} \Big/ \frac{\partial \dot{x}}{\partial J} \right)_{J=J(\dot{x})}$ $J = \frac{\partial S}{\partial x}$, $\bar{C}_n = \int \bar{\omega}(r; x) r^n\, dr$

参考文献

1) H. Nakano, Prog. Theor. Phys. **51** (1974) 1279.

2) L. Onsager and S. Macklup, Phys. Rev. **91** (1953) 1505.

3) H. Hasegawa, Prog. Theor. Phys. to appear

4) H. Hasegawa, Prog. Theor. Phys. **55** (1976) 90.

5) H. Nakano, Prog. Theor. Phys. **49** (1973) 1503.

6) R. Kubo et al, J. Stat. Phys. **9** (1973) 51.